

3-2 ビームライン・実験ステーション

2012年3月から供用運転を開始したSACLAは、当初の立ち上げ期を経て、2013年度は安定的に利用運転が実施された。2012年度に引き続き、ビームライン・実験ステーションの高度化が施設側と国内外の共同研究グループによって行われ、世界最高強度のX線を生成する50ナノメートル集光システムをはじめとする顕著な成果が達成された。また、2013年度には、最初期の利用成果の報告がはじまった。

本章では、はじめにビームライン・実験ステーションの高度化の概要を述べ、利用成果の概要をまとめる。

3-2-1 ビームライン・実験ステーションの高度化

2013年度に実施されたビームライン・実験ステーションの高度化について、いくつかの成果を以下にまとめる。

・50ナノメートル集光システムの開発

東京大学三村秀和准教授、大阪大学山内和人教授らのグループとともに、2段集光光学系の開発を行い、世界最小のXFEL集光径（50ナノメートル）と、世界最高のX線強度（ 10^{20} W/cm²）を達成した^[1]。

X線を極小サイズに集光するためには、集光光学系の Numerical Aperture (NA) を大きく取る必要がある。しかしながら、XFEL光は発散角が非常に小さいため、コンパクト施設であるSACLAにおいては、距離の制限によって集光光学系の位置におけるビームサイズ並びにNAを十分大きくすることが困難であった。

この問題を解決するために、我々は、前置光学系によって

ビームを拡大し、後置光学系によってナノビームを生成するという、2段集光システムの開発を行った。それぞれについて、Kirkpatrick-Baez 配置の斜入射集光ミラーを2枚、合計4枚利用する（図1）。前段のミラーは実験研究棟内のEH4に設置され、後段は約70 m下流の相互利用実験棟内のEH5に配置された。集光鏡には原子レベルの精度が必要であり、山内グループが開発した超精密EEM加工技術により4枚のミラーが作製された。さらに、XFELの光を理想的に集光するために、高精度ミラー姿勢制御装置とX線波面計測システムを開発した。集光実験の結果、理論通りの集光サイズ（縦方向：30ナノメートル、横方向：55ナノメートル）を確認した（図2）。この結果、X線レーザーの集光強度は、 10^{20} W/cm²となり、従来と比較し、2桁の向上をみた。これは、X線として世界最高強度に相当する。

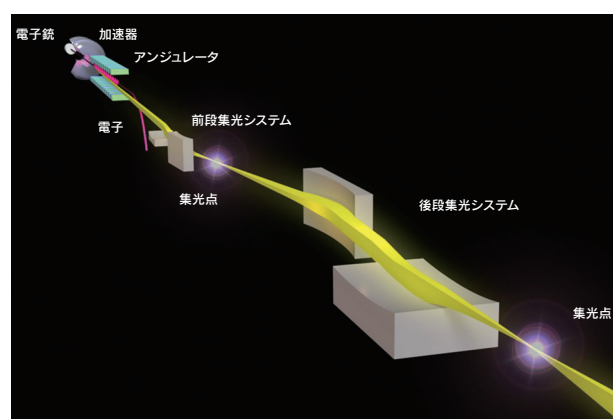


図1 2段集光システムの模式図（SPRING-8 HPより転載）

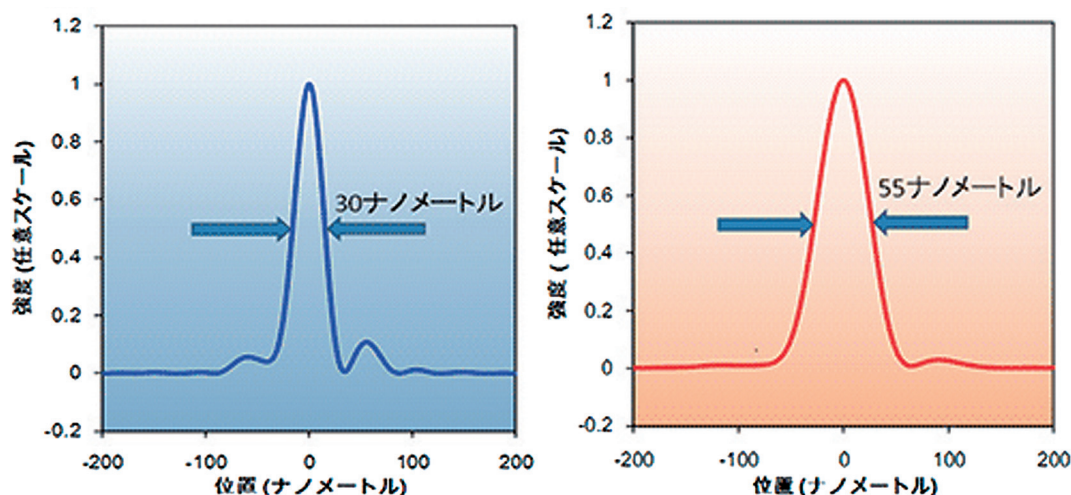


図2 集光プロファイル（SPRING-8 HPより転載）

・D-XASシステムの開発

自己増幅自発放射（SASE）方式のXFELにより準単色（ $\Delta E/E \sim 0.5\%$ ）のフェムト秒X線パルスが生成される。これを活用することで、シングルショットのフェムト秒X線吸収分光法の実現が期待されてきた。しかしながら、SASE-XFELは電子バンチ内のストカスティックな密度変動から成長するため、スペクトルの微細構造はショット毎に完全に異なっている。

このような特異な光源性能を活用するために、我々は、京都大学の鈴木俊法教授の研究グループらとともに、ビーム分割・波長分散型の新しいX線吸収分光法の開発を行った。これは、透過型グレーティングによりビームを2つのブランチに分割した上で、XFEL光に角度発散を与える反射鏡、結晶分光器、及びMPCCD検出器^[2]の3つのコンポーネントを組み合わせた波長分散型のスペクトロメータ^[3]にこれらのブランチを導くものである（図3）。一方をシグナル、他方をリファレンスとして規格化することにより、高い精度で吸収スペクトルを計測することが可能となる。

この方式のフィジビリティを確認するために、我々は、亜鉛のフォイルを試料として吸収端近傍の吸収スペクトル計測を行い、従来の放射光での静的な計測と一致することを確認した^[4]。さらに、鉄シュウ酸アンモニウム錯体水溶液を波長400 nmのフェムト秒光学レーザーで励起し、光学レーザーとXFELパルスの遅延時間の関数として吸収スペクトルを測定した。この結果、300フェムト秒以下の極めて速いスペクトルの変化を高い精度で計測することに成功した。これは、鉄原子の周囲の電子密度分布の高速変化を反映したものである^[5]。

・実験ハッチ恒温化

実験ハッチには、集光ミラーシステムをはじめとする精密X線光学システムが配置されている。これらを安定的に動作させるためには、マイクロラジアンオーダーで光学素子の角度を維持する必要があり、駆動機構並びに周囲の温度変動を $\sim 0.1^\circ\text{C}$ 以下に抑制しなければならない。SACLAの実験ハッチ内は、施設の空調装置によって温度の制御が行われているが、実験時においては、実験装置本体・検出器・制御ラック等、ハッチの内部に熱源が多数配置されてきた。これが、実験期間中に数 $^\circ\text{C}$ にわたる温度上昇を引き起こし、集光性能の長時間の維持を困難としてきた。

この問題を解決するために、ハッチ内の熱源の除去、実験ハッチ内精密温調器の導入、ミラーチャンバー用恒温ブースの設置といった対策を行った。これらの結果、温度変化は大幅に抑制され、数日にわたって安定的に集光ビームを供給することが可能となった。

・BL2 ビームラインの整備

世界で稼働中の硬X線FEL光源は、SACLAと米国LCLSのみであり、XFELサイエンスを幅広く展開する上で、ビームタイムの不足が世界共通の問題となっている。SACLAは、最終的に5本のビームラインが設置可能であり、現在開発が進められている動的パルス振り分けと組み合わせることにより、実効的なビームタイムの飛躍的な増大が期待されている。

2013年度は、新規XFELビームラインBL2の建設が行われた。基本設計は、既存のBL3に準じており、ライフサイエンスを中心としたルーチン的な実験の展開を想定し

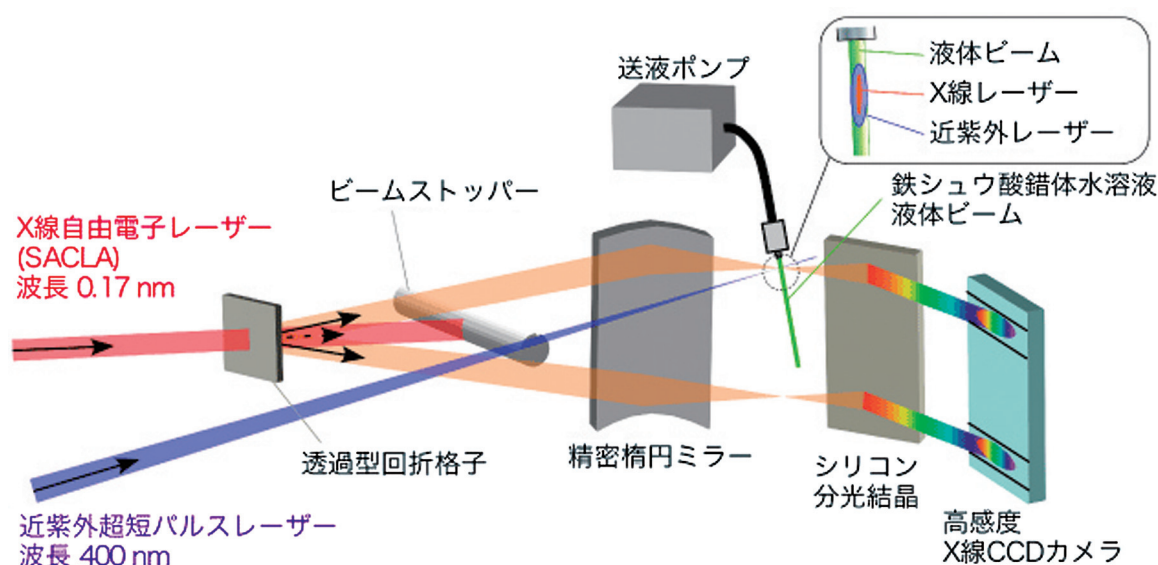


図3 ビーム分割・波長分散型X線吸収分光法の概略図（SPRING-8 HPより転載）



図4 光学ハッチ内に設置されたBL2のビームラインコンポーネント

ている。図4に、光学ハッチ内に設置されたビームラインコンポーネントの外観を示す。実験ステーションには集光ミラーを常設し、1マイクロメートルの集光ビームを供給する予定である。蛋白質結晶構造解析などの定型化が進んだ実験については、専用のプラットフォームを整備し、実験の効率を高めることを計画している。また、BL2用の同期光学レーザーシステムも整備され、ポンププローブ計測にも対応可能とする。2014年度にコミッショニングが行われる予定である。

・ FX10の整備

SACLAとスーパーコンピュータ「京」の連携による実験データ解析技術開発を加速するためにFX10スーパーコンピュータシステム（通称：ミニ京）を2013年度末に導入した（図5）。SACLAの利用実験では1日あたり最大で500万個の2次元データが取得され、このような大量データの解析では「京」などのスーパーコンピュータを利用することが効率的である。「京」との互換性の高いミニ京は、「京」での高精度解析を行う前の事前（粗い）解析、及び、大量データの解析ソフトウェアの開発を目的としている。

ミニ京は、計算ノード群、管理サーバ群、ストレージ群から構成されるシステムであり、その仕様概要を以下のテーブルに示す。

[PRIMEHPC FX10]

計算ノード	384 ノード (4 ラック) SPARC64 IXfx
総理論演算性能	90.8 TFLOPS (1 ノードあたり 236.5 GFLOPS)
総主記憶容量	12 TB (1 ノードあたり 32 GB)
共有ファイル容量	グローバルファイルシステム 500 TB ローカルファイルシステム 100 TB
インターコネクト	6次元メッシュトールス (5 GB/sec 双方向)

[SACLA実験データをFX10に転送するための中継ストレージシステム]

共有ファイル容量	1 PB
----------	------

SACLAでは、大量実験データの読み出し、及び、1次データ解析用として約13 TFLOPSの計算能力をもつデータ解析システムをユーザーに提供してきた。ミニ京と同時期に導入した中継ストレージシステムは、データ解析システムとミニ京の両方の計算ノードから直接アクセス可能であり、これを介してデータ解析システムでの前段処理とミニ京での後段解析を効率的に組み合わせることで、迅速な成果創出が期待できる。ミニ京は、2014年度中にSACLAユーザーの実験データ解析に提供される予定である。また、データ解析システムやミニ京を効果的に利用するための解析端末を備えた解析ルームを2013年度末までに整備し、2014年度から供用予定である。

3-2-2 利用成果の概要

最先端の加速器技術に立脚して設計・建設されたコンパクトXFEL施設SACLAは、XFEL光の波長、ポインティング、ビーム強度等の安定性に優れ、また独自の入射器システムによって10フェムト秒以下の超短パルスX線が通

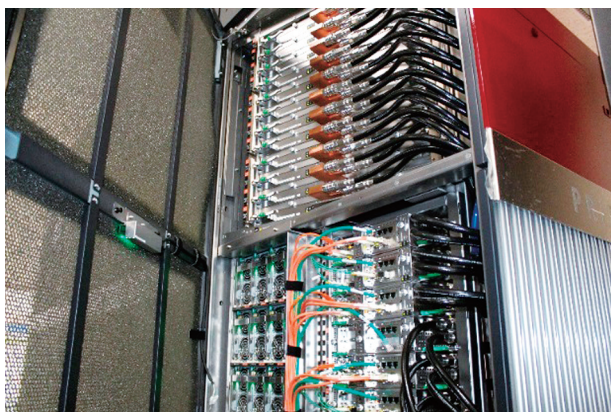


図5 ミニ京（FX10）の写真。ラック外観（左）とラック内の計算ノード群（右）。

常の運転で供給されている。さらに、高品質のビームライン光学系により、極小X線スポットの生成^[1, 6]、分光、偏光制御^[7]をはじめとする様々な特性制御が可能となっている。

2013年度は、これらのユニークな特徴を活かした最初期の利用成果の報告がはじまった。まず、高いピーク強度を利用した先端的な成果として、X線量子光学、X線非線形光学、原子分子光学等を報告する。理研の玉作賢治チームリーダーらの研究グループは、1ミクロン集光システムによって生成される高強度（ $\sim 10^{18}$ W/cm²）かつ高エネルギー（15.0 keV）のX線パルスを利用して、クリプトン原子のK殻の2個の電子を電離させダブルコアホールの状態の生成に成功した^[8]。また、東北大学の上田潔教授らの研究グループは、キセノン原子に集光されたXFEL光を照射し、逐次電離により26価という極めて高く電離された状態を生成した^[9]。

次に、SACLAの高い空間コヒーレンスを利用して、コヒーレント回折イメージング（CDI）の研究が行われた。北海道大学の西野吉則教授らの研究グループは、SACLAで開発された汎用CDIシステムであるMAXIC装置^[10]を利用して、生きた細胞のイメージングに成功した^[11]。また、慶應義塾大学の中迫雅由教授らの研究グループは、試料をクライオ条件で凍結させた状態で計測が可能な装置（壽壺号）を開発し^[12]、粒子径が150ナノメートル程度の金属ナノ粒子に対して内部構造を空間分解能7ナノメートルで観察することに成功した^[13]。

さらに、フェムト秒X線パルスを利用して、物質の超高速ダイナミクスの精密計測が行われた。前節で紹介したように、ユニークなフェムト秒X線吸収分光法の開発とデモンストレーションが行われた^[4, 5]。

参考文献

- [1] H. Mimura et al.: *Nature Commun.* **5** (2014) 3539.
- [2] T. Kameshima et al.: *Rev. Sci. Instrum.* **85** (2014) 033110.
- [3] Y. Inubushi et al.: *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 144801.
- [4] T. Katayama et al.: *Appl. Phys. Lett.* **103** (2013) 131105.
- [5] Y. Obara et al.: *Opt. Exp.* **22** (2014) 1105.
- [6] K. Yumoto et al.: *Nature Photon.* **7** (2013) 43.
- [7] M. Suzuki et al.: *J. Synchrotron Rad.* **21** (2014) 466.
- [8] K. Tamasaku et al.: *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 043001.
- [9] H. Fukuzawa et al.: *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 173005.
- [10] C. Song et al.: *J. Appl. Cryst.* **47** (2014) 188.
- [11] T. Kimura et al.: *Nature Commun.* **5** (2014) 4052.
- [12] M. Nakasako et al.: *Rev. Sci. Instrum.* **84** (2013) 093705.
- [13] Y. Takahashi et al.: *Nano Lett.* **13** (2013) 6028.

RSC ビームライン研究開発グループ

矢橋 牧名

JASRI XFEL 利用研究推進室

登野 健介、城地 保昌、片山 哲夫